

УДК 549.6.04

В.О.Дяків, О.І.Матковський, В.В.Шум
Львів. Державний університет ім. Івана Франка

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФРАКТАЛЬНОГО
(ДЕНДРИТНОГО) РОСТУ МІНЕРАЛЬНИХ І БІОМІНЕРАЛЬНИХ
АГРЕГАТІВ**

Відома робота Бенуа Мандельброта “Фрактальна геометрія природи” [25] зробила своєрідний “переворот” у методах пояснення динамічних властивостей природних явищ і стала основою для розробки теорії фракталів, названої його ім'ям (ТФМ). Особливу цінність методи фрактальної геометрії набули у зв'язку з розвитком комп'ютерних технологій. Візуалізація складних моделей, можливість проведення недорогого комп'ютерного моделювання різко збільшила зацікавлення дослідників методами на основі ТФМ.

Цьому значною мірою сприяв поступ у розвитку в останні десятиліття персональних електронно-обчислювальних машин. Комп'ютерні технології сприяли вивченню поведінки складних динамічних систем, зумовили розвиток методів комп'ютерного (числового) моделювання (КМ) процесів росту кристалів і полікристалічних агрегатів. Виявилося, що в цьому відношенні фрактали найбільше зв'язані з теоріями самоорганізації та детермінованого хаосу [16].

Різке зростання швидкодії та об'єму оперативної пам'яті ЕОМ, їх загальної доступності та поширення зумовили те, що комп'ютерне моделювання на основі ТФМ стало потужним інструментом у вирішенні ряду важливих наукових завдань у галузі матеріалознавства, фізичної хімії, фізики напівпровідників. У той же час цей метод дуже рідко застосовують при вирішенні мінералогічних проблем [15]. Не в останню чергу це пов'язано з тим, що результати, скажімо, онтогенічних спостережень значною мірою є суб'єктивними та не можуть бути повністю стандартизовані. Один і той ж об'єкт двома дослідниками може бути описаний зовсім по-різному, незважаючи на загальновизнані підходи, правила й послідовність опису. Відповідно, існує деяка упередженість щодо принципової можливості застосування комп'ютерного моделювання.

Цьому сприяють і об'єктивно існуючі обставини щодо неможливості повної відповідності між реальним та ідеальним, реальним об'єктом та його моделлю. Іноді навіть можна почути: “Аналогія не доказ”, “Моделі не можна вірити”, “Що в комп'ютер закладеш, те з нього й отримаєш”, “Це занадто спрощена модель” і т.п. [6]. Однак це ніяк не може бути аргументом проти даного методу пізнання. Адже абстрактна аналогія здатна встановлювати такі характеристики онтогенезу, які практично неможливо помітити чи діагностувати візуально або інструментальними методами. Ці об'єктивно існуючі особливості далеко не завжди проявляються в онтогенезі агрегатів, оскільки можуть бути замасковані накладеними вторинними процесами.

Загальновідомим є те, що будь-яка реальна система кристалогенезу пов'язана зі значною кількістю змінних параметрів середовища і не завжди її можна описати

лінійно. Ось чому спроби пізнання процесів, що у ній відбуваються, не можливі без створення моделі, як правило, завжди спрощеної у порівнянні з реальним аналогом.

1. Підходи до формування алгоритмів моделювання

Як показав Mandelbrot В.В. [25], траєкторія блукання броунівської частинки є одним із найпростіших фракталів. Кожна така частинка характеризується точкою початку руху, траєкторією та точкою її зіткнення з іншою частинкою чи агрегацією (припиненням блукання). Розгортку цієї траєкторії можна розглядати як простий процес агрегації так званих випадкових блукань (рис. 1).

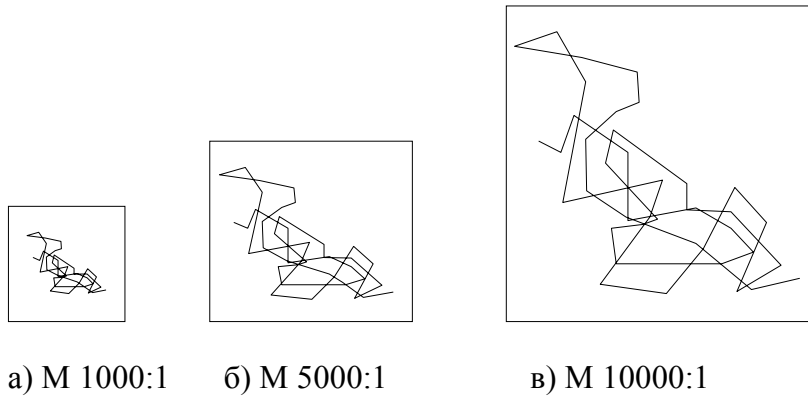


Рис. 1. Масштабна інваріантність (самоподібність) траєкторії броунівського руху

Хоча дві однакові траєкторії знайти дуже важко, та кожна з них має чимало масштабно-інваріантних (подібних до неї) аналогів [13]. Тобто, немає повністю ідентичних агрегатів, є лише самоподібні. Випадковість блукання є визначальним чинником для їх формування.

При агрегації блукаючих частинок до кластера (нерухомого субстрату, до якого приєднуються частинки) формуються агрегати, які фізично самоподібні до дендритів [2, 8, 14, 19]. Такий спосіб формування агрегатів у літературі [5] описаний як фрактальний ріст чи фрактальна кристалізація. Ці терміни запропонували в 1984 р. R.M.Brady, R.C.Ball [24] у застосуванні до формування дендритів електролітичної міді та у 1992 р. – Є.Ю.Ведмеденко та ін. [5, 23] для опису процесів формування дендритних агрегатів компонентів жовчі [4, 11]. Інтенсивний розвиток ТФМ в останні роки дав змогу застосувати різні підходи до її використання при комп'ютерному моделюванні процесів росту [1, 9, 10, 12, 18, 22, 27].

Пропоновані алгоритми моделювання процесів агрегації є модифікованими варіантами описаних у літературі; дещо модифікована модель “випадкового дощу” [12] та модель “дифузійно-обмеженої агрегації” (ДОА) [18], реалізовані у власних програмних продуктах, написаних на мові C++. В обох випадках моделюється кінетична поведінка агрегату, який формується при масовій кристалізації з нерівноважної системи як наслідок її самоорганізації.

В основу запропонованих уявлень про механізм фрактального росту агрегатів покладене твердження про статистично-рівномірну дифузійну міграцію компо-

нентів середовища у кристалізаційному дворіку навколо агрегату, що росте [14]. При цьому дифузія ускладнюється процесами фільтрації, які супроводжують сорбцію, та адгезією компонентів при їх взаємодії з агрегатом [1]. Припустимо, що:

1. Первинні центри зароджень агрегату розподілені за законом Пуасона.
2. Живлення центрів зародження та їх фрактальний ріст здійснюються шляхом дифузії частинок до центрів зародження.
3. Сорбція й адгезія компонентів здійснюється шляхом фільтрації крізь лакуни (порожини) фрактальних мікроструктур агрегатів та на їх поверхні.
4. Кількість агрегованих частинок N за час t у точці X інтервалу між двома сусідніми ділянками агрегату та кількість адсорбованих частинок M за час t у точці Y інтервалу між поверхнею та центром зародження описуються системою диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned} dN/dt &= D * [(d^2N)/(dX^2)]; \\ dM/dt &= V * [(dM)/(dY)], \end{aligned}$$

де D – коефіцієнт дифузії; V – швидкість фільтрації.

Розв'язання цих диференціальних рівнянь визначає механізм формування агрегатів: фрактальний (дендритний) – при $dN/dt > dM/dt$ ($D/V \gg 1$) чи тангенційний – при $dN/dt < dM/dt$ ($D/V \ll 1$). Усі ці наближення є функцією такого параметра реальних систем, як рівень пересичення (розбавлення), який, у свою чергу, визначає кінетичні параметри – швидкість і механізм росту агрегату чи його розчинення.

Розглянемо лише випадок фрактального (дендритного) росту.

2. Модель дендритного росту на основі “випадкових блукань” (ВБ)

Модель ВБ реалізована у програмі *fractal4*. Процес довільної ітерації (блукання) обмежується лише дифундуванням у межах матриці у вигляді круглого диска, а зона генерації блукаючих частинок – квадратною ґраткою по периферії окружності наперед визначеної потужності. Кількість (концентрація) частинок попередньо детермінована. Кожна генерована частинка (кандидат на агрегацію) рухається за випадковою (пересічною) траєкторією в межах матриці ітерацій.

При виході за межі матриці частинка знищується, а на її місце із зони генерації дифундує нова частинка. Нова частинка генерується також у випадку приєднання (агрегації) частинки до кластера. Таким чином, у будь-якому випадку кількість частинок у зоні генерації є сталою.

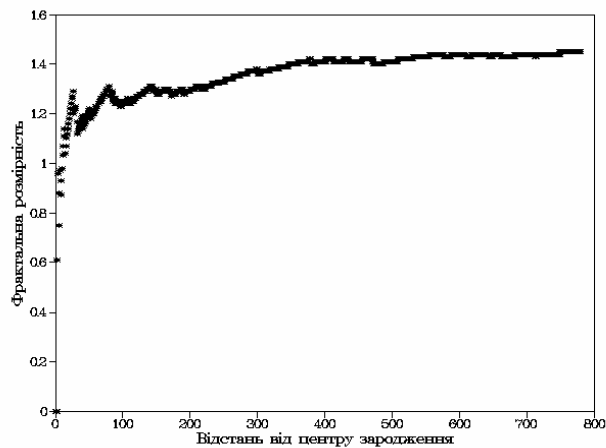
Модель передбачає наявність вакансій для приєднання блукаючої частинки, її наближення до зародку, осадження, агрегацію та кристалізацію [9]. Внаслідок приєднання частинки до кластера формуються нові вакантні посадочні місця. Кількість основних напрямків росту визначається конкурентною боротьбою в процесі агрегації.

Запуск програми *fractal4* здійснюється з операційних систем *MS DOS* чи *Windows*. Нижче подається короткий опис роботи програми.

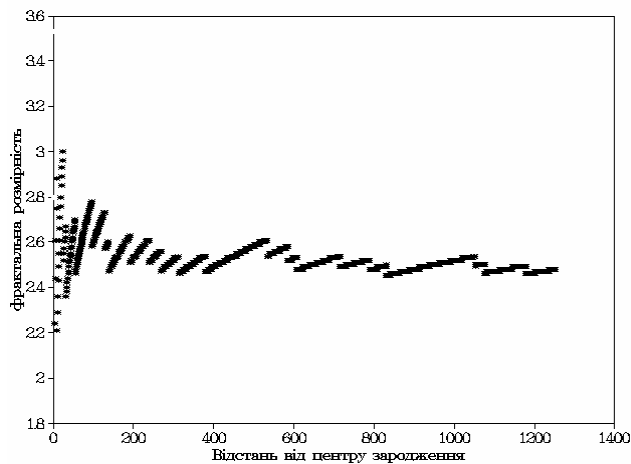
- 1) Задається кількість блукаючих одночасно частинок;
- 2) задаються координати центру зародження кластера;
- 3) визначається радіус матриці навколо центру зародження кластера, в межах якої будуть відбуватись ітерації частинок;
- 4) визначається потужність периферійної частини матриці, де будуть генеруватись нові частинки (ширина дворика);

5) задається ім'я вихідного файлу, в який будуть записані результати числового моделювання у текстовому форматі.

Після цього починається формування кластера. За процесом моделювання можна слідкувати по графічному зображенню на моніторі. У будь-який момент ріст кластера можна припинити та записати результати числового моделювання у файл з попередньо визначеною назвою. Вихідний файл має таку структуру: перша колонка – номер по порядку приєднаної частинки, друга – координати по осі X , третя – координати по осі Y в екранній системі координат; четверта – відносний час блукання частинок.



а



б

Рис.2. Динаміка варіацій фрактальної розмірності дендритного кластера у двовимірному (а) та тривимірному просторі (б)

Обробка результатів моделювання може здійснюватись у будь-якій електронній таблиці. За описаними нижче методиками визначалась фрактальна розмірність і динаміка її варіацій у часі на різних етапах росту кластера.

Фрактальну розмірність (D) розраховували за формулою:

$$D = \ln(A \cdot N(r) \cdot p) / \ln(r), \quad 1.1$$

де A – площа одиничної комірки (блукаючої частинки) – $A = 1$;

r – радіус кластера;

$N(r)$ – загальна кількість частинок, що входять до кластера радіусом r ;

$p = 3,14$.

Радіус кластера дорівнює відстані від координат найвіддаленішої точки кластера в даному інтервалі до координат зародку і визначається за формулою:

$$r = \pi(|x1-x2|^2 + |y1-y2|^2), \quad 1.2$$

де $x1, y1$ – координати зародку;

$x2, y2$ – координати найвіддаленішої точки кластера.

Динаміку варіацій фрактальних розмірностей у часі визначали як функцію залежності фрактальної розмірності від відстані до центру зародження. Результати розрахунків виносили на графік (рис. 2).

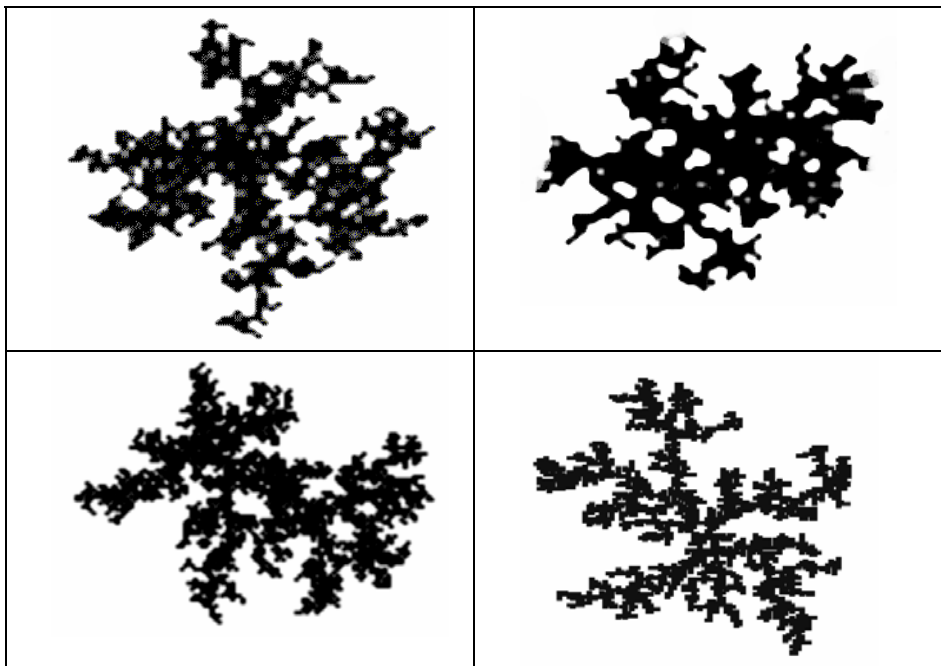


Рис. 3. Приклади кластерів, які виростили в моделі “випадкових блукань”

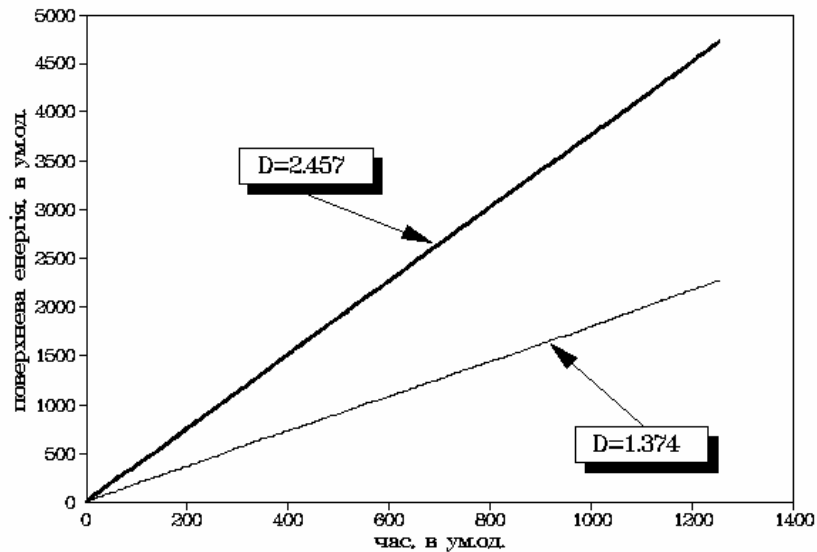


Рис. 4. Просторова залежність енергетичної напруженості агрегатів:
 $D = 1,374$ – у двомірному та $D = 2,457$ – у тримірному просторі

Залежно від розміру матриці та кількості блукаючих частинок, динаміка варіацій фрактальної розмірності в усіх проведених експериментах має γ -подібну форму, причому на першій стадії росту в деяких випадках відбуваються значні варіації D . На стадії дендритного (власне фрактального) росту D має значення від 2,3 до 2,88. Зі зростанням розмірів кластера його фрактальна розмірність набуває сталих значень (див. рис. 2).

Характерні приклади кластерів, що вирости в моделі “випадкових блукань”, наведені на рис.3.

Як бачимо, дана модель породжує розгалужені структури, гілки яких на певних етапах росту можуть зростатися між собою, утворюючи різні за розмірами лакуни (порожнини). Ці лакуни, накопичуючись, створюють поля енергетичних напруг, які можуть бути охарактеризовані динамікою змін фрактальної розмірності на площині та в просторі. На рис. 4. показана ця залежність для агрегатів, що вирости за однакових умов у двомірному та тримірному просторі.

3. Модель дифузійно-обмеженої агрегації (ДОА)

Описані вище результати числового моделювання за методом ВБ не відтворюють такі фізичні властивості реальних дендритів, як поверхневий натяг, теплопровідність, симетрія кристалічної ґратки, поверхнева дифузія. Деякі з цих властивостей можна реалізувати у моделі ДОА, враховуючи в алгоритмі такі припущення:

1. Ефект поверхневого натягу був частково врахованим при приписуванні більшій ймовірності приєднання до вузла, що має багато найближчих сусідів.
2. При приєднанні частинок до зародження виділяється прихована теплота, яка з часом відцентрово поширюється всередині кластера таким чином, що потік тепла

прямо пропорційній різниці температур між сусідніми, ще не виповненими комірками. Тобто, в полі цих теплових потоків прихованої теплоти кристалізації ймовірність приєднання значно менша.

3. Симетрія кристалічної ґратки в першому наближенні може бути врахована при допущенні, що у кластера відсутні елементи симетрії. Ідеальним же втіленням врахування симетрії кристалічної ґратки при моделюванні процесів фрактального росту було би застосування форми частинки з параметрами елементарної комірки.
4. Поверхнева дифузія враховувалася тоді, коли частинка могла блукати по поверхні (периферії кластера) доти, доки вона не виявиться у вузлі з максимальною кількістю сусідів чи мінімальною прихованою енергією кристалізації.

Модель росту характеризується набором ймовірностей $\{P_i\}$ того, що кожен вузол на зовнішньому периметрі в даний момент часу стане частиною кластера. Це дає змогу статистично охарактеризувати здатність кожного вузла до росту в межах периметру кластера, оцінити таким чином потенційні напрямки для фрактального росту.

Анізотропія розмірів блукаючих частинок співрозмірна з розмірами елементарної комірки мінералу, і – як наслідок – три варіанти поведінки:

1. $F \leq W \leq G$
2. $F = W = G$
3. $F \geq W \geq G$,

де W – ймовірність приєднання.

Приєднуючись до одного з посадочних місць, частинка тим самим збільшує “конкурентоспроможність” даного атрактора та ймовірність чергового приєднання на певне значення. Фрактальні кластери ростуть рекурсивно за допомогою зміни параметрів функцій F та G , що дозволяє перейти від k -тої точки на площині до $(k+1)$ -ї точки за наступним правилом:

$$X(k+1) = F(x(k), y(k), p), \quad Y(k+1) = G(x(k), y(k), q),$$

де p та q – постійні параметри всіх ітерацій.

Таким чином, аттрактори можна визначити як центри притягування, які ведуть боротьбу за вплив на ріст агрегату (кластера). Внаслідок такої боротьби в моделі ДОО найбільш “гарячими” вузлами (ріст яких є найімовірніший) є ті, що розташовані на виступах кластера [21]. Найбільш “холодні” вузли знаходяться у глибині “фіордів”, оскільки характеризуються досить малими значеннями ймовірності приєднання до них частинок. Модель реалізована за допомогою програми **fractals** для персонального комп'ютера типу *IBM AT*, з урахуванням наведених вище допущень, за наступним алгоритмом.

Заданий центр зародження розташований у центрі круглої матриці. По периферії матриці, в межах визначеної зони, генеруються частинки, кількість яких також попередньо визначена. Кожна генерована частинка (кандидат на агрегацію) із зони генерації рухається за випадковою траєкторією в межах матриці. При виході за межі матриці частинка знищується, а на її місці в межах зони генерації генерується нова. Вона генерується також у випадку приєднання (агрегації) частинки до кластера. Таким чином, кожна частинка, стартуючи з випадково вибраної точки, також рухається за випадковою пересічною траєкторією при сталій кількості частинок, що блукають.

Запуск програми **fractals** здійснюється з середовища *MS DOS* чи *Windows*. Нижче наведено короткий опис програми.

- 1) задається кількість блукаючих частинок;
- 2) задаються координати центру зародження кластера;
- 3) визначається радіус матриці навколо центру зародження кластера, в межах якої відбуватимуться ітерації частинок;
- 4) визначається потужність периферійної частини матриці, де будуть генеруватись нові частинки (ширина дворика);
- 5) задається ім'я вихідного файлу, в який записуватимуться результати числового моделювання в текстовому форматі.

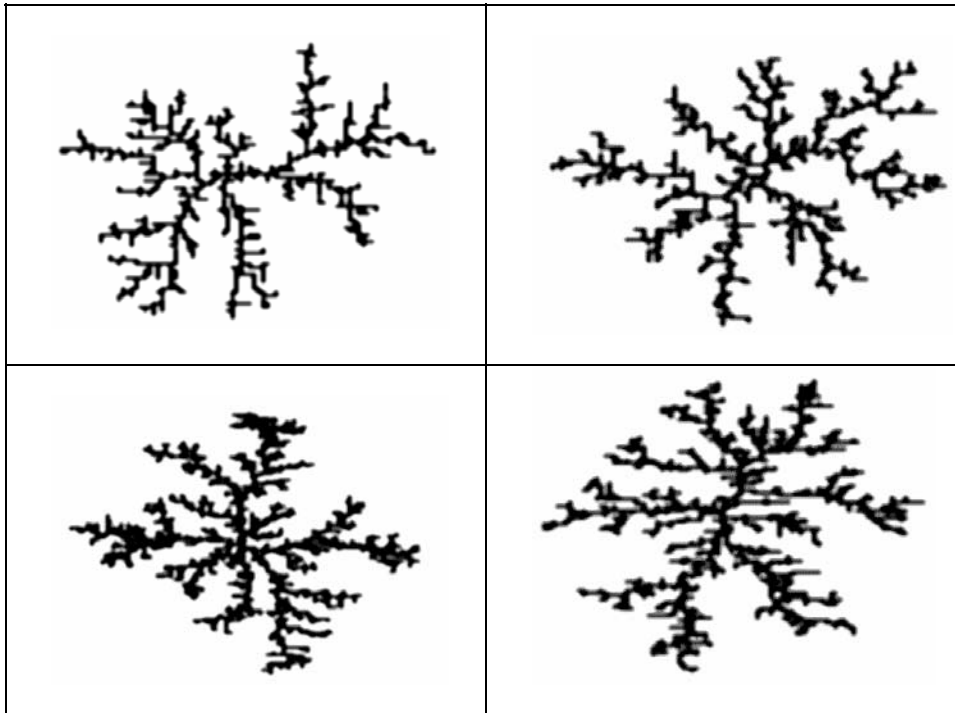


Рис.5. Приклади кластерів, що виростили у моделі “дифузійно-обмеженої агрегації”

Після запуску програми за процесом моделювання слідкують по графічному зображенні на моніторі. У будь-який момент можна припинити ріст кластера та записати результати числового моделювання у файл з попередньо визначеною назвою. Вихідний файл має таку структуру: перша колонка – номер за порядком приєднання частинок до кластера; друга – координати по осі X ; третя – координати по осі Y ; четверта – відносний час блукання частинок; п'ята – енергія кластера; шоста – фрактальна розмірність. Обробка результатів моделювання здійснювалась у цифровій формі (електронні таблиці *QPRO* та *EXCEL*) при імпорті з текстового файлу.

Характерні приклади кластерів, які виростили в моделі “дифузійно-обмеженої агрегації”, зображені на рис. 5.

Як показав Л.Сандер [18, 27], дифузійно-обмежена агрегація з точкового зародження призводить до формування розгалужених і радіально-променистих агрегатів.

У процесі подальшої еволюції такого роду дендрити трансформуються у сфероліти – промені сферолітів зароджуються з гілок дендритів. Таким чином, сформовані в моделі ДОА фрактальні кластери є прототипами первинних нерівноважних тримірних дендритів.

4. Аналіз та інтерпретація результатів моделювання

Спостерігаючи за процесом та аналізуючи результати комп'ютерного моделювання, чітко бачимо ряд ростових ефектів, які не завжди можна виявити й описати при звичайних онтогенічних спостереженнях. Натомість комп'ютерне моделювання процесів росту не тільки дає змогу це зробити, але й прослідкувати за динамікою змін у часі. Серед такого роду ростових ефектів при моделюванні у двовимірному просторі найкраще проявлені ефекти “затінення”, коалесценції, персистенції та сферолітизації первинного дендриту.

4.1. **Ефект “затінення”** виникає під час блокування розростання потенційного напрямку росту інтенсивніше зростаючою гілкою фракталу, а також при швидкому осадженні на ростучу поверхню частинок, коли останні “не встигають” вибрати найвигідніші з точки зору мінімуму поверхневої енергії позиції та випадково агрегуються до кластера.

Сегмент кластера зі складнішою будовою, як правило, пригнічує ріст менш розгалуженого сегмента (див. рис. 5). При цьому формується флукуаційний рельєф ростучої поверхні. В процесі росту він в умовах броунівського руху частинок буде визначати потенційні напрямки для росту внаслідок нерівномірного розподілу агрегованих частинок по зовнішньому периметру агрегату. Такі потенційні напрямки росту (інтенсивно ростучі гілки фракталу) будуть гальмувати, “затінювати” та блокувати ріст інших напрямків флукуаційного рельєфу та гілок фракталу.

У реальних мінеральних і біомінеральних агрегатах ефект “затінення” особливо чітко виявляється як у класичних прикладах конкурентного росту індивідів у межах агрегату, так і опосередковано – у надзвичайно великій різноманітності морфології агрегатів (особливо біогенного походження). Під час моделювання він краще проявляється в моделі ДОА.

4.2. **Ефект “коалесценції”** – взаємодії, злипання та зростання гілок фракталу (дендриту) між собою. Внаслідок цього формується мікроструктура з чисельними порожнинами або лакунами (див. рис. 3). У реальних системах цьому ефекту сприяє енергетична напруженість приповерхневого ростучого шару в умовах обмеженості процесів дифузії тепла від ростучої поверхні на межі поділу фаз. Під час моделювання краще проявляється у моделі ВП.

4.3. **Ефект “персистенції”** – вплив попереднього явища на наступне [26] під час росту фрактального кластера в замкненій системі. Чітко проявляється у змінах потужності, топологічної та фрактальної розмірності модельного агрегату залежно від його розмірів. Кожне нове покоління характеризується неперервними значеннями фрактальної розмірності F в межах від меншого (F_b) на початку до більшого (F_p) наприкінці: $F = (F_b + F_p)/2$.

Сукупність поколінь при цьому формує стрибкоподібну криву, яку можна описати нерівністю:

$$(F_b + F_p1) < (F_b + F_p2) < (F_b + F_p3) < \dots < (F_b + F_pN)$$

В усіх експериментах з числового моделювання мало місце зменшення топологічної розмірності елементів мікроструктури від центру до периферії та зростання їх фрактальної розмірності у цьому ж напрямку (див. рис. 4). У реальних

системах цьому ефекту сприяють автохвильові процеси зменшення концентрації розчиненої фази під час росту та зростання “апетиту” агрегату при збільшенні його розмірів, внаслідок чого зростає компактність агрегату.

4.4. *Ефект “сферолітизації первинного дендриту”* – на певному етапі росту дендритного кластера – при “виснаженні кристалізаційного дворику”, з метою мінімізації поверхневої енергії, первинний дендрит може руйнуватися [20] або намагається набути симетрії сфери. Це чітко проявляється при аналізі ступеня ізотропності кластера. В зв’язку з цим гілки, які вийшли за межі сфери, перестають рости, а гілки, що не доросли до поверхні сфери, рано чи пізно досягають цього.

Висновки

Процес тангенційного росту кристаліту (ізометричного, повністю виповненого кластера) триває доти, доки кривизна поверхні кристалізаційного дворику є мінімальною. Така ситуація триває до того моменту, поки кристалізаційний дворик, в якому росте кристаліт, не почне контактувати, взаємодіяти і, нарешті, не агрегується із собі подібними. Коли ж відбувається така агрегація, то формується матриця, в якій відбувається кристалізація речовини за принципово іншими законами. У такій матриці відбувається агрегація не тільки молекул, але й кристалітів. Зароджується та формується самоподібний (фрактальний) агрегат (кластер). Раніше порушений при рості кристаліту принцип мінімуму поверхневої енергії поновлюється в матриці на рівні агрегату (оскільки неможливо ліквідувати дефекти упаковки між кристалітами, що з’єдналися у кластер).

Отриманні результати комп’ютерного моделювання свідчать про домінування на початковій стадії росту дендритів і сферолітів механізму фрактальної агрегації. У цей період матриця, в якій формується агрегат, намагається захопити як можна більший простір, у межах якого є будівельний матеріал. Зі збільшенням розмірів фрактального кластера зростає його компактність (фрактальна розмірність). Агрегат росте до тих пір, поки не виснажується матриця (кристалізаційний дворик). Останнє призводить до того, що фрактальна кристалізація рано чи пізно припиняється. Більш імовірним є зародження нового кластера, аніж відновлення фрактального росту агрегату, який досяг критичного розміру.

Спостереження за формуванням розгалужених агрегатів і дендритів методом КМ дозволяє зовсім по-іншому дивитись на реальний онтогенез агрегатів у процесі мінералогічних спостережень [3, 7]. При виявленні таких агрегатів найчастіше фіксується лише факт їхньої наявності у складі мінеральних комплексів, тоді як КМ дало поштовх до визначення таких характеристик агрегатів, як напрямок росту та кількість гілок у дендритному кластері, число “поколінь”, ступінь виповнення простору, фрактальна розмірність тощо.

Комп’ютерний синтез фрактальних агрегатів дозволив вивчити динамічну поведінку та сформувані статистичні уявлення про умови прояву різних ростових ефектів при формуванні топологічних точкових множин.

Автори вдячні доктору медичних наук, професору Я.В.Ганіткевичу та кандидату геол.-мін. наук, доценту Л.З.Скакуну за корисні поради та підтримку досліджень.

1. Аллен К., Клуатр М. Экспериментальное исследование двумерной агрегации // Фракталы в физике : Тр. VI Междунар. симп., 9-12 июля 1985. М., 1988.
2. Асбахов А.М. Процессы и механизмы кристаллогенеза. Л., 1984.

3. Дяків В.О., Ганиткевич Я.В. Фрактальный механизм роста желчных камней // Тез. стэнд. докл. Фальк-симпозиума № 92 "Новые направления в гепатологии". Санкт-Петербург, 1996. Т. 2. С. 138.
4. Варшавская О.А., Класс С.М., Зейферт А.В., Кононенко Е.В. Упорядочение липидов и липидо-белковых комплексов в слизи моллюсков и желчи человека // Биофизика. 1983. **28**, № 3. С. 427-431.
5. Ведмеденко Е.Ю., Кувичка И.Н., Курик М.В. Взаимосвязь мицеллярности биожидкостей и их фрактальной кристаллизации // Письма в ЖТФ. 1992. **18**, № 5. С. 67-69.
6. Веников В.А. Теория подобия и моделирования. М., 1976.
7. Ганиткевич Я.В., Дяків В.О., Матковський О.І. Біомінералогічна модель міжкамінцевих (міжфрактальних) взаємодій у багаточисельних асоціаціях жовчевих камінців // Вісник Львів. ун-ту. Серія геол. 1999. Вип. 13. С. 106-115.
8. Голиков И.Н., Масленков С.Б. Дендритная ликвация в сталях и сплавах. М., 1977.
9. Гуйе Ж.-Ф., Россо М., Саповал Б. Перколяция в градиенте концентрации // Фракталы в физике : Тр. VI Междунар. симп., 9-12 июля 1985. М., 1988. С. 189-195.
10. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М., 1990. Т.2.
11. Запецкий Е.В., Кононенко Е.В. Особенности кристаллизации холестерина в желчи // Биофизика. 1983. **27**, № 4. С. 701-702.
12. Каприле Б., Леви А., Лиджери Л. Моделирование дендритного роста на основе "случайного дождя" // Фракталы в физике : Тр. VI Междунар. симп., 9-12 июля 1985. М., 1988. С. 388-394.
13. Кольб М. Обратимость при агрегации кластеров // Там же. С.365-369.
14. Кузьменков Л.С. Рост структур с сохранением их подобия. Теория А.А.Власова // Процессы реального кристаллообразования. М., 1977. - С.227.
15. Лельчук В.И., Бабаева Е.М., Корчуганова С.М. Моделирование на ЭЦВМ процесса распределения и роста карбонатных конкреций в угольных пластах Кузбасса // Конкреции и конкреционный анализ : Тез. докл. Всесоюз. конф. Харьков, 1973. С.163-165.
16. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с наукой. М., 1986.
17. Пьетронеро Л., Эвертс К. Свойства подобия растущей зоны и емкость лапласовских фракталов // Фракталы в физике : Тр. VI Междунар. симп. 9-12 июля 1985. М., 1988. С.221-226.
18. Сандер Л. Котинуальная ДОА: случайный рост, порождаемый детерминистической моделью // Там же. С. 337-344.
19. Саратовкин Д.Д. Дендритная кристаллизация. М., 1957.
20. Солла С. Разрушение нагруженных фрактальных деревьев // Фракталы в физике : Тр. VI Междунар. симп. 9-12 июля 1985. М., 1988. С. 255-259.
21. Туркевич Л., Шер Г. Закон масштабного преобразования вероятности присоединения частицы в модели ДОА // Там же. С. 311-320.
22. Шум В.В., Матковский О.И., Дяків В.А. Компьютерное моделирование процессов дендритного (фрактального) роста биоминеральных агрегатов на основе моделей "случайного дождя" и диффузионно-ограниченной агрегации // "Кристаллография-98" : Материалы ко 2-му Уральскому кристаллограф. совещ. Сыктывкар, 1998. С.115.

23. *Balazs A.C., Karasz F.E., MacKnight W.J.* The aggregation of reverse micelles. A computer simulation // *Cell. Biophys.* 1987. V.11. P. 91-97.
24. *Brady R.M., Ball R.C.* Fractal growth of copper electrodeposits // *Nature.* 1984. **309**, № 5965. P. 225-229.
25. *Mandelbrot B.B.* Fractal Geometry of Nature. San Francisco, 1982.
26. *Popov K.G., Tikhonov N.A.* Features of gelation process in the vicinity of the crystal point of reaction yield // *Mineralogy and Life : Biomineral Interactions.* Abstr. II Intern. Seminar. Syktyvkar, 1996. P. 12-14.
27. *Sander L.M.* Fractal growth // *Sci. Amer.* 1987. **256**, № 94.

V.O.Dyakiv, O.I.Matkovsky, V.V.Shum

COMPUTER MODELING OF FRACTAL (DENDRITIC) GROWTH PROCESSES OF MINERAL AND BIOMINERAL AGGREGATES

On the base of fractal theory two algorithms for computer modeling of the dendritic growth mineral and biomineral aggregates have been realized. Two models of fractal growth are described: "casual rain" and "diffusion-limited aggregation". Computer modeling method has been applied for investigated effects of the "shadowing", "sticking" (coalescention), "inheritancing" (persestention) and spherulitisation of primary dendrites.

Стаття надійшла до редколегії 04.04.1999